

## ナフトキノンの縮環した 2,5-ジ(1,3-ジチオール-2-イリデン)-1,3-ジチオラン-4-チオン誘導体の固体中での分子配列とその光物性

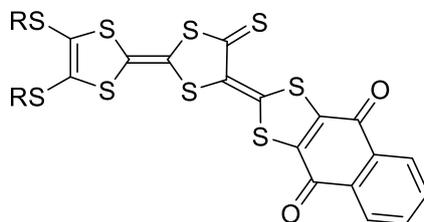
(静岡大工<sup>1</sup>・静岡大院総合科学研究科<sup>2</sup>・阪大産研<sup>3</sup>) ○植田 一正<sup>1,2</sup>・茂泉 圭亮<sup>1</sup>・小林 収<sup>2</sup>・嵩原 綱吉<sup>3</sup>・鈴木 健之<sup>3</sup>

Solid State Molecular Arrangements and Optical Properties of Naphthoquinone Fused 2,5-Di(1,3-dithiol-2-ylidene)-1,3-dithiolane-4-thione Derivatives (<sup>1</sup>Faculty of Engineering, <sup>2</sup>Graduate School of Integrated Science and Technology, Shizuoka University, <sup>3</sup>SANKEN Osaka University) ○Kazumasa Ueda<sup>1,2</sup>, Keisuke Shigeizumi<sup>1</sup>, Shu Kobayashi<sup>2</sup>, Tsunayoshi Takehara<sup>3</sup>, Takeyuki Suzuki<sup>3</sup>

Tuning of solid-state colors of redox active molecules is one of the current issues for an application of functional dyes to the light absorbing system. We have synthesized methyl phthalate and phthalonitrile fused 2,5-di(1,3-dithiol-2-ylidene)-1,3-dithiolane-4-thione derivatives and investigated their optical properties. Recently we succeeded in molecular structure analyses of the naphthoquinone fused derivatives (**1a** – **1c**) and examined their molecular arrangements in solid state and the optical properties. All compounds have a longest maximum absorption wavelength around 1250 nm in solid state. The normalized absorbance of **1b** around 1250 nm is largest among three derivatives. Single crystal X-ray structure analyses of **1a**, **1b** and **1c** reveal that **1b** molecules stack with inversion symmetry but others stack with translational symmetry.

*Keywords* : Functional Dyes; Molecular Arrangement; Optical Properties

酸化還元能を有する分子の希薄溶液中および固体状態での色調制御法の確立は、機能性色素の光吸収材料への応用の際の重要な要素技術の一つである。これまでに、フタル酸ジメチルやフタルロニトリルの縮環した表題のπ共役骨格の誘導体の末端のアルキル基の長さを変えることによる、固体の光吸収を検討してきた。今回、ナフトキノンの縮環した誘導体 (**1a** – **1c**) の分子配列と光物性の検討を行った。固体の吸収スペクトルでは、1250 nm 付近に最長の極大吸収波長があり、**1b** の吸光度が最も大きいことが明らかとなった。X線単結晶構造解析より、**1b** は並進対称性を保ちながら積層しているのに対し、**1a** と **1c** は反転対称性を保ちながら積層していることが明らかとなった。



**1a**: R = CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, **1b**: R = CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, **1c**: R = CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>4</sub>